



TITLE:

III-2 格子模型による諸近似の比較 と多体力の検討(液体金属の構造と 物性,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

小川, 泰

CITATION:

小川, 泰. III-2 格子模型による諸近似の比較と多体力の検討(液体金属の構造と物性,基研研究会報告). 物性研究 1970, 14(6): B28-B28

ISSUE DATE:

1970-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88132>

RIGHT:

米沢富美子・小川 泰

$P_{\alpha\beta} = u_{\beta}$ である。したがって、モンテカルロ法は結局、Iの(1), (2)の条件をみたす $P_{\alpha\beta}$ を選んで、マルコフ過程の問題をプログラムすることになる。(1), (2)の条件があっても、 $P_{\alpha\beta}$ はユニークに決らないので $P_{\alpha\beta}$ として微視的な可逆性 $u_{\alpha} P_{\alpha\beta} = u_{\beta} P_{\beta\alpha}$ を用いて

$$\frac{P_{\alpha\beta}}{P_{\beta\alpha}} = \frac{u_{\beta}}{u_{\alpha}} = \frac{P_{\beta}}{P_{\alpha}} = e^{-\beta(U_{\beta} - U_{\alpha})}$$

によって $P_{\alpha\beta}$ を決める。

III-2 格子模型による諸近似の比較と多体力の検討

京大・理 小川 泰

液体の統計力学の conventional な立場は二体分布関数に対する積分方程式であり、Yvon-Born-Green eq, Kirkwood eq. Hyper-Netted Chain eq. Percus-Yevick eq. 等があり、この見方に沿ってより高次の多体相関を入れる考え方があるが、その他に物性研の液体金属研究会(本誌10月号に報告掲載予定)で述べたように、近距離の多体相関を重視する Bethe 近似的立場があり、hard sphere が essential な high density fluid に対してはこの見方の方がよいと考えられるが、三次元連続空間でこれを行うのは事実上不可能と思われる。

格子化するのは致命的なこともありうるが、考え方と結果を比較するために格子系に限って種々の approach をしてみたい。

例えば話題提供で述べた Kikuchi model について、積分方程式的扱いも行い、Kikuchi の方法による結果と比較する。また三粒子が一辺が 2nd neighbour distance の正三角形に配置したときに三体力が働くといった最も簡単な三体力模型でその効果を調べてみることも可能である。このような模型での電子状態も調べてみたい。京大・理の種村正美・小倉久和両君とのグループで研究を進めている。